コネクショニストモデルの忘却を用いた 一般構造学習

正 員 石 川 眞 澄 (九州工大)

A General Structural Learning of Connectionist Models Using Forgetting

Masumi Ishikawa, Member (Kyushu Institute of Technology)

The backpropagation through time, a learning algorithm for recurrent networks, has a drawback of being unable to provide structural information, such as locations of feedback loops in a network. I have previously proposed a structural learning algorithm with forgetting of link weights for hierarchical networks. By eliminating unnecessary links due to forgetting, the structural learning can generate a skeletal structure reflecting inherent regularity in training patterns.

Proposed here is a general structural learning algorithm with forgetting for recurrent networks by combining the above two algorithms. This algorithm can generate a skeletal structure for recurrent networks based on input and output sequences with no prior structural information.

Four kinds of Jordan networks are selected as typical examples of recurrent networks including feedback and self loops. The proposed algorithm can, in most cases, rediscover the original Jordan network structure solely from input and output sequences. This well demonstrates the effectiveness of the proposed algorithm in rediscovering the original network structure for recurrent networks.

キーワード：コネクショニストモデル，ニューラルネットワーク，リカレント，構造学習，忘却

1. ま え が き

コネクショニストモデルあるいはニューラルネットワークモデル(同義に使うことが多い⁽¹⁾)で最も一般的な構造は，任意のユニット間にリンクの張られている密結合ネットワークである。階層的ネットワークやジョルダンのネットワーク⁽²⁾などはこの特殊な場合に相当している。本論文では，フィードバックループや自己ループを含む一般的な構造であるリカレントネットワークの学習を扱う。

このリカレントネットワークの学習法として Williams らの通時的誤差逆伝播 (Backpropagation Through Time) 学習などの方法が提案されている⁽³⁾。ただ，これらによりリカレントネットワークの学習を行ってもほとんどのリンクが残存するため，フィードバックループや自己ループがどこにあるかという構造情報が明確にはならない。これらの構造情報は，得られたネ

ットワークを理解するうえで極めて重要である。この事情は，階層的ネットワークで誤差逆伝播学習⁽¹⁾を行っても，ほとんどのリンクが残存するため，必要な隠れ層数や各層での隠れユニット数などの構造パラメータが明確にならないと同様である⁽⁴⁾。

著者は学習の目的として，入出力間の写像をネットワーク上に再現するにとどまらず，訓練パターンに含まれる規則を発見することが重要であると考えている。この考え方に従い，忘却を用いた構造学習法を既に提案した⁽⁴⁾。これは，階層的ネットワークを対象とし，訓練パターンに内在する規則性の発見を目的とする。すなわち，リンク重みに忘却を導入して不要なリンクを消滅させることにより，規則性を反映した骨格構造が出現する。この学習法には，層数や隠れユニット数などの構造パラメータを試行錯誤的に探索する必要がなく，誤差逆伝播学習に比べて一般化能力が大きいなどの利点がある。

本論文では、階層的などの構造に関する事前情報を必要としないネットワークの新しい構造学習法を提案し、これを忘却付き一般構造学習法と名づける⁽⁵⁾。この基本的アイデアは、通時的誤差逆伝播学習法と忘却付き構造学習法を組合せた点にあり、前者のレカレントネットワークの学習と、後者の構造の学習という二つの利点を兼ね備えた新しい学習法である。

すべてのユニット間にリンクの張られた密結合ネットワークから出発して本手法による学習を行うことにより、不要なリンクが忘却により消滅し、レカレントネットワークの骨格構造を生成できる。この骨格構造の生成は、従来の方法では得られない大きな特長である。この特長により、後述のようなネットワーク構造の再発見が可能になる。

以下、第2章では通時的誤差逆伝播学習法の概要を述べる。第3章では忘却付き構造学習法の概要を述べると共に、両者を組合せた忘却付き一般構造学習法について説明する。更に、この手法の有効性を確かめるため、第4章で入出力系列に基づくジョルダンネットワーク構造の再発見を幾つかの例について行う。

2. 通時的誤差逆伝播学習法

通時的誤差逆伝播学習法⁽³⁾は、外部入力系列と一部のユニット（可視ユニットと呼ぶ）の目標出力系列が与えられた場合、これらを再現するリカレントネットワークを求めるための学習法である。

基本的には、図1(a)のようなリカレントネットワークに対し、各時刻ごとにそのコピーを用意し、これを時刻順に並べて(b)図のような階層的ネットワークを構成する。ここで、ある時刻のユニットが、次の時刻のすべてのユニットと結合されているネットワークが密結合ネットワークに相当する。この場合、 n 個のユニットに対して、自己ループも含め n^2 本のリンクが存在する。各時刻のユニット群に外部入力に加えられ、また各時刻の可視ユニットに目標出力が与えられている。なお、リンクで結合された次時刻のユニットに活性化が伝播するのに要する時間は、どのリンクも同一と仮定している。

時間軸方向に展開された図1(a)では、各階層が時刻に対応するという特殊性はあるものの、基本的には誤差逆伝播と類似の学習が可能である。いま時刻 t_0 から時刻 t_1 までを考えるものとする。時刻 t_0 のユニット活性化および同時刻の外部入力、時刻 t_0+1 のユニットに伝播するという形で、活性化が順次時間軸方向に伝播する。逆に、時刻 t_1 の出力誤差から同時刻のユニットの誤差が定まり、次にこの誤差と時刻

Fig.1. Network structure in the back-propagation through time.

t_1-1 の出力誤差から、時刻 t_1-1 のユニットの誤差が定まるといように、誤差が順次逆時間方向に伝播する。

この逆方向への誤差の伝播は以下のように定式化できる。各時刻 t での第 k ユニットの出力誤差 $e_k(t)$ は、

$$e_k(t) = \begin{cases} d_k(t) - y_k(t); & k \in T(t) \\ 0 & ; \text{その他} \end{cases} \quad \text{.....(1)}$$

ただし、 $d_k(t)$: 時刻 t での目標出力、
 $y_k(t)$: 最刻 t での出力、 $T(t)$: 時刻 t での可視ユニット集合

時刻 t_0 から t_1 までの最小化すべき評価関数 J は、

$$J(t_0, t_1) = 1/2 \sum_{t=t_0+1}^{t_1} \sum_k e_k(t)^2 \quad \text{.....(2)}$$

各ユニットの誤差 δ は次のように再帰的に求め得る。

$$\epsilon_k(t_1) = e_k(t_1) \quad \text{.....(3)}$$

$$\delta_k(t) = f' \{s_k(t)\} \epsilon_k(t) \quad \text{.....(4)}$$

$$\epsilon_k(t-1) = e_k(t-1) + \sum_m w_{mk} \delta_m(t) \quad \text{.....(5)}$$

ただし、 f : 各ユニットの出力関数（ロジスティック関数）、 f' : その微分、 $s_k(t)$: 時刻 t での第 k ユニットへの入力量、 w_{mk} : 第 k ユニットから第 m ユニットへのリンク重み、 $\delta_k(t)$: 時刻 t の第 k ユニットの誤差

(5)式右边第1項が時刻 $t-1$ における出力誤差、第2項が時刻 t での各ユニットの誤差 δ を時刻 $t-1$ に逆伝播したものである。

(3)～(5)式に従って各時刻でのユニットの誤差 δ を求めると、誤差逆伝播学習の場合と同様に、リンク重みの修正値 Δw_{mk} は次式で与えられる。

$$\Delta w_{mk} = \eta \partial J / \partial w_{mk} = \eta \sum_{t=t_0+1}^{t_1} \delta_m(t) f\{s_k(t-1)\} \dots\dots\dots (6)$$

上式に従い重みを修正すると、学習係数 η が小さい限り(2)式の評価 J が小さくなることは偏微分の定義から明らかであろう。なお実際には一回前の重み修正量も考慮に入れたいわゆるモーメント項を付け加えることが多い⁽¹⁾。

3. 忘却付き一般構造学習法

忘却を用いる構造学習法は、リンク重みに忘却を導入することにより、不要なユニットやリンクを消滅させ、ネットワーク中に骨格構造を形成する⁽⁴⁾。この場合の評価関数として次式を用いる。

$$J = \sum_i (y_i - d_i)^2 + \epsilon' \sum_{m,k} |w_{mk}| \dots\dots\dots (7)$$

ただし、右辺第1項は出力誤差の自乗和であり、誤差逆伝播学習法における評価である。第2項はリンク重みの絶対値和である。第2項は、重みが零になる点以外では線形関数であり、学習の収束性などには悪影響を与えない⁽⁴⁾⁽⁸⁾。(7)式をリンク重み w_{mk} に関して偏微分すると、繰返しごとの重みの修正量 $\Delta w_{mk}'$ が次式で与えられる。

$$\Delta w_{mk} = -\eta \partial J / \partial w_{mk} = \Delta w_{mk} - \epsilon \operatorname{sgn}(w_{mk}) \dots\dots\dots (8)$$

ただし、 Δw_{mk} ：誤差逆伝播学習法による重み修正量、 $\epsilon (= \eta \epsilon')$ ：繰返しごとの忘却量、 $\operatorname{sgn}(x)$ ： x が正で1、 x が負で-1、 x が0で0をとる符号関数

できるだけ小さなネットワークを生成しようという類似の学習法も幾つか提案されており、これら諸手法との比較は文献(6)を参照されたい。

(1)～(6)式と(7)～(8)式を組合せた、忘却付き一般構造学習法がここでの提案である⁽⁸⁾。これにより階層的ネットワークの場合と同様に、忘却により不要なリンクが消滅し、リカレントネットワークの骨格構造が出現することが期待される。

なおここでの忘却は、図1で時刻が進むことによる忘却ではなく、一つの系列を呈示して一回の学習を行い、次の学習までの間に各リンク重みが一定量減衰

するという意味での忘却である。

一般に入出力系列とリカレントネットワークとは一対多の関係にあることは自明であろう。すなわち、入出力系列が与えられると、これを再現するリカレントネットワークは無数に存在する。この事情は、階層的ネットワークの場合も同様である。本手法は、忘却の働きにより、与えられた入出力系列を実現するネットワークのうちで、できるだけ単純なネットワークを求めるものである。なお学習の際、極小値に陥ることもあるので、常に最小のネットワークが生成される保証はない。しかし、次章の幾つかの例で示すように、極小値に陥る可能性は経験的にはそれほど大きくない。

4. 一般的構造の再発見例

本章では幾つかのリカレントネットワークを取上げ、その構造に関する事前情報を用いないで、ネットワーク構造を構造学習により再発見する課題を扱う。すなわち、ある構造のネットワークに外部入力系列を加えて出力系列を求め、これを目標出力系列と考える。これらの外部入力系列および目標出力系列だけに基づいて、最も一般的な構造である密結合ネットワークから出発して、忘却付き一般構造学習により、元のネットワーク構造を再発見することを目的とする。

ここではリカレントネットワークの典型例として、フィードバックループや自己ループを含むジョルダンネットワークを取上げる。以下の各例において、図1のネットワークで十分な数のユニットを用意し、任意の時刻 t のユニット群と次の時刻 $t+1$ のユニット群がすべて結合した密結合ネットワークから出発する。これが、事前の構造情報を用いないことに相当している。またリンクの初期重みは乱数で与える。

〔例1〕単純なジョルダンネットワーク：図2(a)に示すジョルダンネットワークから得られた長さ20の外部入力系列および目標出力系列だけに基づいて、忘却付き一般構造学習を行う。同図には○内にユニット番号を、リンクにはその重みの値を併せて示してある。十分な数のユニットとして1時刻につき5個のユニットを用意してある。時間ステップ数が20であるので、21層のネットワークとなる。従って、ユニットの総数は105個(=5×21)である。

外部入力口はユニット②に入り、可視ユニット①のみが目標出力を与えられている。外部入力としては、ランダムではないが相当大きく変動するデータを1系列だけ用いた。複数個用いることももちろん可能である。なお外部入力からユニット②へのリンクの重みは固定で2とする。外部入力の入るユニット②、および

図 2 単純なジョルダンネットワークの構造再発見
Fig. 2. Rediscovery of a simple Jordan network.

可視ユニット①以外は、どのユニットが何に使われるか、あるいは消滅するかは事前にはわからず、学習の結果により定まる。ここでユニットが消滅するとは、当該ユニットへのすべてのリンクおよび当該ユニットからのすべてのリンクが忘却により消滅することを意味する。なお図2では若いユニット番号が使われるよう番号を付け替えている。

3種類の異なる初期リンク重みから出発して学習を行った結果をそれぞれケース1、2、3と呼ぶ。なお学習係数 $\eta=0.1$ 、モーメント係数 $\alpha=0.2$ 、忘却量 $\epsilon=10^{-4}$ を用いた。学習に要した繰返し回数は 35,000 ~ 50,000 回であり、出力誤差は 1% 以下と十分小さくなった。ケース1を(b)図に示す。同図では余分の二つのユニットが消滅し、元の構造を再発見できたことがわかる。得られたリンク重みの値は(a)図の正解とは異なっているが、これは何の支障もない。なぜならば、ユニット①からユニット②への伝達特性を定めても、中間のユニット③のとり得る値に関しては自由度が残っているからである。実際、(a)図と(b)図は、状態ユニット③の役割が異なっているだけで、入力端②と出力端①から見る限り全く等価である。

ケース2を(c)図に示す。これは正解とは異なる構造であるが、(a)図でのユニット③の役割が③④の二つに分離したと考えれば理解できる。ケース3は重みの値は異なるものの、(b)図と同型の構造である。なお、1時刻について5個よりも多くのユニットを用いて構造学習をしても、消滅するユニット数が増えるだけで、生成される骨格構造は不変である。

訓練用とは異なる新しい外部入力系列に対する出力誤差は、実際の出力の 3% 程度であり、十分高い一般化能力が得られている。

ケース1の(b)図の場合、25 (=5×5) 本のリンク中4本だけが残存している。これと同じ初期重みを用い

リンク重みの絶対値が 0.1 以上のリンクのみを表示

図 3 通時的誤差逆伝播学習による単純なジョルダンネットワークの学習例

Fig. 3. A learning result of a simple Jordan network by backpropagation through time.

て、通時的誤差逆伝播学習を行った結果を図3に示す。同図では、絶対値が 0.1 以上の重みを有するリンクのみを示す。それでも 20 本ものリンクが残存し、これから構造を読取ることは不可能である。リンクが多いためリンク重みの表示は省略するが、概略の大きさはリンクの太さから推察できよう。

〔例2〕複雑なジョルダンネットワーク：図4(a)に示すジョルダンネットワークから得られた長さ 20 の外部入力系列および目標出力系列に基づいて、その構造を再発見する。1時刻についてユニットを 8 個用意しており、外部入力口はユニット③に入り、ユニット①②のみが目標出力を与えられている。

3種類の異なる初期重みから出発して学習を行った。なお学習係数、モーメント係数、忘却量、外部入力は例1と同じである。50,000 回の繰返し学習の結果、例1と同様に十分小さな出力誤差が得られた。結果の一例を(b)図に示す。同図では余分の2個のユニットが消滅している。他の二つのケースも、リンク重みの値は異なるものの、これと同型の構造である。こ

図 4 複雑なジョルダンネットワークの構造再発見

Fig. 4. Rediscovery of a complex Jordan network.

れらはいずれも元の構造とほとんど同一であるが、ユニット⑤から③への一本のリンクが付加されている点異なる。これは、ユニット⑤から①へのパスが元の構造では1本であったものが、構造学習の結果2本になり表現が分散的になったためであり、最小構造ではなく、極小値解が得られたものと考えられる。しかしこの場合にも、入力端③と出力端①②から見る限り元のネットワークと等価である。

【例3】カスケードモデル：図5(a)に示すカスケードモデル⁽²⁾から得られた長さ20の外部入力系列および目標出力系列に基づいて、その構造を再発見する。これはジョルダンの提案した制御のためのモデルであり、フォワードモデル部分(制御対象のモデルに相当する部分で、ユニット①～③)とコントローラ部分(④⑤)から構成されている。このうちフォワードモデル部分はその構造およびリンク重みを既知とする。1時刻についてユニットを7個用意してあり、外部入力口はユニット④に入り、ユニット①のみが目標出力を与えられている。

3種類の異なる初期重みから出発して学習を行った。なお学習係数、モーメント係数、忘却量、外部入力は例1と同じである。31,000～61,000回の繰返し学習により、例1と同様に十分小さな出力誤差が得られた。結果の一例を(b)図に示す。同図では余分の二つのユニットが消滅し、正解と同型の構造が得られた。残りの二つのケースでも、リンク重みは少しずつ異なるものの、同型の構造が得られた。

何も構造情報がなく密結合ネットワークから出発する例1、例2のような場合だけでなく、部分的に構造やリンク重みが既知である場合でも、忘却付き一般構造学習が有効であることを例3は示している。事前情報によりネットワークの自由度が減った分だけ構造学習が容易になる。すなわち、本来49本(=7×7)の学

図 5 カスケードモデルの構造再発見

Fig. 5. Rediscovery of a cascade model.

習すべきリンクがあるが、フォワードモデル部分が既知であるため、学習すべきリンク数は少なくなる。ユニット数3のフォワードモデル部分で9(=3×3)本のところが(a)図に示すように4本ですむ。更に、ユニット②がフォワードモデルの入力、ユニット①が出力なので、ユニット②③から④～⑦への8本のリンク、およびユニット④～⑦から①③への8本のリンクは考慮しなくてすむ。このため、学習すべきリンク数は28(=49-5-8-8)本となる。

【例4】冗長性のある単純なジョルダンネットワーク：図6(a)に示すジョルダンネットワークから得られた長さ20の外部入力系列および目標出力系列に基づいて、その構造を学習する。このネットワークは残存率が同一の状態ユニットが2個あるので冗長である。1時刻につき5個のユニットを用意する。外部入力口はユニット②に入り、可視ユニット①のみが目標出力を与えられている。

3種類の異なる初期重みから出発して学習を行った。なお学習係数、モーメント係数、忘却量、外部入力は例1と同じである。20,000～50,000回の繰返し学習により、例1と同様に十分小さな出力誤差が得られた。結果の1例としてケース1を(b)図に示す。同図では余分の二つのユニットが消滅し、元の構造の冗長な部分を除去した構造が得られた。すなわち、元の構造での冗長な状態ユニット③④の役割を、一つの状態ユニット③が果たしている。この冗長性を除去するという特性は、骨格構造を求めるという一般構造学習らしい特性である。

(c)図に示すケース2では、正解構造とは異なる構造が得られた。すなわち二つのユニット③④を用いて元のネットワークと等価なネットワークを生成している。ケース3は重みの値は異なるものの、(b)図と同型の構造が得られた。

以上では、すべての時刻において可視ユニットに対

図 6 冗長なジョルダンネットワークの構造再発見
Fig. 6. Rediscovery of a redundant Jordan network.

して目標出力が与えられている場合について述べたが、(1)式での可視ユニット集合 $T(t)$ は時間的に変動しても差し支えない。すなわち、各時刻で可視ユニット集合が変わってもよいし、目標出力が毎時刻与えられる必要もない。例えば図 2 (a) で一時点おきに目標出力が与えられた場合でも、一般構造学習によりほぼ同様な結果が得られている。

一般には、(時刻数×ユニット数) からなる集合の部分集合に対して目標出力が与えられればよい。もちろん、この部分集合が大きいくほどより多くの情報が与えられることに相当し、正しい構造を再発見しやすくなる。例えば、系列長が長くなったり、ユニット中の可視ユニット数が増えることがこれに相当する。ただし、系列長が長くなることは、階層数およびユニット数が増大することを意味し、学習に要する計算時間の更なる増大をもたらす。

5. む す び

ここで提案した忘却付き一般構造学習法は、構造に関する事前情報なしに、入出力系列からその構造を見つけ出す方法である。ここでは、正解の構造がある場合のジョルダンネットワーク構造の再発見という課題に適用し、その有効性を確認できた。

ここでの学習は、入出力系列に基づいて、これらを再現するできるだけ単純な構造を求めることに相当するので、未知構造の同定ととらえることもできる。各ユニットの特性がシグモイド形という特殊な非線形性を有することを除けば、構造に関して何らの仮定を必要としないノンパラメトリックな同定ともいえる。

ただ現実には、膨大なユニットで構成される超多層ネットワークになるので、計算量が通常の誤差逆伝播学習に比べて桁違いに多く、比較的単純なケースでないときれいな構造が出現しないなど、今後に残された

課題も多い。

もっと複雑な課題に適用するには、まず比較的単純な課題に対して構造を発見し、得られた構造的知見を複雑な課題に拡張して構造的制約を導入することにより、忘却付き一般構造学習を適用しやすくするなど様々な工夫が必要と考えられる。

(平成 3 年 9 月 4 日受付)

文 献

- (1) D. E. Rumelhart, J. L. McClelland & the PDP Research Group: Parallel Distributed Processing, 1 & 2 (1986) The MIT Press
- (2) M. I. Jordan: "Generic constraints on under-specified target trajectories", International Joint Conference on Neural Networks, p. 1217-225, Washington D. C. (1989)
- (3) R. J. Williams & D. Zipser: "Gradient-based learning algorithm for recurrent networks", to appear in Y. Chauvin & D. E. Rumelhart eds., "Back-propagation: Theory, Architectures and Applications", Erlbaum.
- (4) 石川: 「忘却を用いたコネクショニストモデルの構造学習アルゴリズム」, 人工知能学誌, 5, No. 5, 595 (平 2)
- (5) 石川: 「コネクショニストモデルの忘却を用いた一般構造学習」, 信学技報, NC89-99 (平 2)
- (6) 石川: 「ネットワーク学習アルゴリズムの最近の課題」, 計測と制御, 30, No. 4, 285 (平 3)
- (7) 石川: 「コネクショニズムと学習」, 認知科学の発展, 4, 51 (平 3)
- (8) 石川: 「忘却付き構造学習の理論的・実験的検討」, 神経回路学会第 2 回全大, p. 87 (平 3)

石 川 眞 澄 (正員)

昭 49 年東京大学大学院博士課程修了。同年電子技術総合研究所入所。61~62 年カリフォルニア大学客員研究員。平成 2 年九州工業大学情報工学部教授。現在に至る。工学博士。ニューラルネットワークに関する研究に従事。56 年電気学会論文賞受賞。人工知能学会, 神経回路学会会員。